

Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна

А. В. Пантелеймонов, І. В. Христенко,
В. В. Іванов, Ю. В. Холін

**ІНФОРМАТИКА
ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ
ДЛЯ ХІМІКІВ**

навчальний посібник
для студентів хімічного факультету

ХАРКІВ – 2023

Курс «Інформатика та інформаційні технології для хіміків» викладається студентам 2 курсу хімічного факультету протягом осіннього семестру.

В посібнику наведено програму та структуру навчальної дисципліни, типові задачі для розв'язання, алгоритми розв'язання завдань, приклади модульних контрольних робіт.

Посібник розрахований на аудиторне та самостійне виконання завдань. Наведені задачі мають різний рівень складності.

Електронна версія посібника розміщена на сайті кафедри хімічного матеріалознавства
www-chemo.univer.kharkov.ua.

Рецензенти:

М. О. Мchedlov-Петросян, д.х.н., професор, завідувач кафедри фізичної хімії Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

С. Г. Степаньян, к.ф.-м.н., с.н.с. відділу молекулярної біофізики ФТІНТ імені Б. І. Веркіна НАН України.

Рекомендовано до друку Вченою радою хімічного факультету, протокол № 4 від 15.04.2011.

Зміст

Вступ	2
Структура навчальної дисципліни	8
Розподіл балів, які отримують студенти	9
Шкала оцінювання	9
I. Знайомство з текстовим процесором MICROSOFT WORD	10
II. Робота у редакторі ISIS DRAW (або xDrawChem).	15
Знайомство з MICROSOFT POWERPOINT	
III. Знайомство з програмним пакетом MICROSOFT EXCEL	19
<i>Контрольна робота № 1</i>	25
IV. Знайомство з програмним пакетом Sci	27
	41
<i>Контрольна робота № 2</i>	
V. Матриці в описі хімічних рівнянь	42
VI. Рівняння матеріального балансу	46
<i>Контрольна робота № 3</i>	48
VII. Регресійний аналіз	50
VIII. Теорія графів і топологічні індекси	54
IX. Знаходження залежності «структура – властивість»	58
X. Адитивні схеми	64
<i>Контрольна робота № 4</i>	67
Додатки	69
Рекомендована література	70

Вступ

Хімію неможливо уявити без експериментальних досліджень. Дані хімічного експерименту (від вимірювань температур топлення до різноманітних спектральних досліджень) обов'язково вимагають обробки та структурування. Саме тому у ХХ сторіччі бурхливого розвитку набула така міждисциплінарна царина, як хімічна інформатика.

Розвиток хімічної інформатики тісно пов'язаний з можливостями обчислювальної техніки. Так, розрахунок середнього значення вибірки можливий за умов розвинених навичок усних розрахунків, в той час як інтегрування та диференціювання спектроскопічних піків вимагає залучення комп'ютерної техніки.

Даний посібник розрахований на студентів хімічних факультетів, які у навчанні, у курсах аналітичної, фізичної, колоїдної, теоретичної або органічної хімії використовують засоби обробки даних. У посібнику наведені алгоритми розв'язку основних задач, із якими стикаються студенти хімічних факультетів при виконанні лабораторних робіт при вивченні нормативних курсів.

Розв'язання задач посібнику можна провести за допомогою комбінування різноманітних математичних та статистичних пакетів (R, SciLab, Matlab, MatCad, Excel). Основна увага в рамках даного посібнику приділена саме розрахункам в рамках пакетів SciLab і Excel як найбільш зручним, та таким, які не потребують спеціальних навичок користувача.

Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Лекції	
№ теми	Зміст теми
1.	Поняття інформації, отримання, передача та збереження інформації. Кодування інформації. Двійкове кодування інформації в комп'ютері. Одиниці вимірювання інформації. Файл як центральна концепція інформатики.
2.	Архітектура комп'ютера. Загальна схема пристроїв: системний блок, пристрої вводу та виводу інформації. Склад, принципи роботи та характеристики процесора. Пам'ять, різновиди пам'яті. Запам'ятовуючі пристрої (накопичувачі на жорстких та гнучких дисках, вінчестер, носії інформації).
3.	Програмне забезпечення роботи комп'ютера. Класифікація програмного забезпечення: системне, прикладне, інструментальне. Системне програмне забезпечення. Поняття, функції, характеристики операційних систем. Типи операційних систем. Поняття файлу, файлової системи.
4.	Комп'ютерні мережі. Призначення та типи комп'ютерних мереж. Апаратне забезпечення мережі. Глобальна мережа Internet. Поняття протоколу. Правила адресації Internet. Основні служби Internet.
5.	Програмне забезпечення для хіміків. Пошукові системи. Бази даних для хіміків. Сучасні редактори для хімічних текстів. Проблема сумісності хімічних редакторів з текстовими процесорами. Візуальне відображення молекул, структур та експериментальних даних. Спеціалізовані квантовохімічні програми.

6.	Основи матричної алгебри. Алгебра векторів. Матриця як лінійне перетворення векторів. Спеціальні матриці (нульова, одинична, скалярна). Операції з матрицями. Функції від матриць. Ранг матриці. Вироджені матриці. Норма матриці. Детермінант матриці. Обернена матриця. Розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Матричне представлення. Числа обумовленості матриці. Задача на власні значення. Матриці проектування та спектральний розклад.
7.	Використання матриць для опису будови хімічної речовини. Представлення брутто-формули речовини у вигляді векторів. Атомна матриця. Теорема про ранг атомної матриці. Побудова атомних матриць молекулярних та іон-молекулярних сумішей. Узагальнена атомна матриця яка урахує структурну будову речовини на прикладі насичених вуглеводнів.
8.	Матриці у хімічних реакціях. Зображення реакцій у алгебраїчній формі. Кількість лінійно незалежних реакцій, що описують задану реакційну суміш. Ранг стехіометричної матриці. Стехіометричне правило Гібса. Вибір незалежних компонент у розрахунках стехіометричних коефіцієнтів. Приклади розрахунків реакційних сумішей.
9.	Рівняння матеріального балансу. Побудова стехіометричної матриці методом прямого обернення субматриць. Кількість речовини у ході реакції. Повнота реакції. Розрахунок матеріального балансу за допомогою стехіометричних співвідношень. Параметричне рівняння простої та складної реакції. Ліва

	обернена матриця. Ключові речовини. Інваріант хімічної реакції. Теореми про змінення хімічного складу під час реакцій.
10.	Регресійний аналіз у хімії. Уявлення про рівняння регресії. Полілінійна (множинна лінійна) регресія. Метод найменших квадратів. Стандартне відхилення та коефіцієнт кореляції. Методики перехресного оцінювання (LOO). Метод найменших модулів.
11.	Теорія інформації та її використання у хімії. Загальне поняття про інформацію. Формула Шенона. Зв'язок інформації з ймовірністю. Одиниці виміру інформації. Використання інформації у хімії. Зв'язок інформації з ентропією. Інформаційні структурні індекси. I_D , IC_0 , IC_1 , IC_2 та інші похідні індекси. Проблема прогнозу біологічної активності молекул.
12.	Елементи теорії графів. Поняття про граф. Задача Ейлера. Орієнтований та неорієнтований граф. Дводольний граф. Маршрут у графі, ланцюг, цикл. Топологічна матриця. Матриця інцидентії та матриця дистанцій. Деякі теореми з теорії графів. Проблема перерахування ізомерів. Уявлення про теорію Пойа. Топологічні інваріанти графа. Структурні індекси молекул (індекс Вінера, індекс Рандіча). Застосування графів у дослідженні хімічних реакцій.
13.	Адитивні схеми у проблемі розрахунків фізико-хімічних характеристик молекул. Методи розкладення структури молекул на фрагменти. Матричне формулювання розрахунків структурних інкрементів. Метод Татевського. Температури атомізації та ізомеризації насичених вуглеводнів. Ліпофільність

	вуглеводнів та октанові числа. Еквівалентність та нееквівалентність різноманітних адитивних схем. Проекційний та статистичний метод оцінювання адитивних схем. Матричне формулювання методу найменших квадратів.
14.	Методи вирішення некоректних задач регресійного аналізу. Загальне уявлення про коректні та некоректні фізико-хімічні задачі. Некоректність за Адамаром та Тихоновим. Число обумовленості матриці. Псевдообернена матриця. Рівняння Пуассона. Розрахунки псевдооберненої матриці. Псевдовирішення прикладної матричної задачі. Метод регуляризації за Тихоновим. Функціонал Тихонова. Нормальне рівняння. Вибір параметру регуляризації.
Модуль 2. Лабораторні заняття	
15.	Створення документів за допомогою текстового процесору Microsoft Word.
16.	Знайомство з редактором хімічних формул ISIS Draw.
17.	Створення презентації (Power Point).
18.	Знайомство з Excel. Створення таблиці даних. Робота з математичними та логічними функціями. Робота з масивами. Побудова діаграм та графіків.
19.	Знайомство з MatCad. Основні арифметичні операції. Диференціювання. Інтегрування. Побудова графіків. Операції з матрицями. Розв'язання системи лінійних рівнянь.
20.	Застосування матриць при описі хімічних реакцій.
21.	Рівняння матеріального балансу.
22.	Регресійний аналіз.

23.	Теорія графів та топологічні індекси. Адитивні схеми.
24.	Підсумкове заняття.

Структура навчальної дисципліни

№ теми	Кількість годин					
	Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	ср
1.	4	2				2
2.	7	3				4
3.	7	3				4
4.	6	2				4
5.	5	2				3
6.	8	4				4
7.	6	2				4
8.	7	2				5
9.	7	2				5
10.	9	4				5
11.	7	2				5
12.	7	2				5
13.	7	2				5
14.	9	4				5
15.	4			2		2
16.	2			1		1
17.	3			1		2
18.	9			6		3
19.	6			2		4
20.	10			6		4
21.	8			4		4
22.	6			4		2
23.	4			2		2
24.	14			8		6
Усього годин	162	36		36		90

Розподіл балів, які отримують студенти

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Екзамен	Сума
Модуль 1	Модуль 2					
Т1-Т14	Т15-18	Т19	Т20-21	Т22-23	Разом	
10	10	10	15	15	60	40
						100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	відмінно
70 – 89	добре
50 – 69	задовільно
1 – 49	незадовільно

I. Знайомство з текстовим процесором

MICROSOFT WORD

Microsoft Word – потужний текстовий процесор, що використовується для виконання різноманітних операцій з обробки тексту. Word надає багато можливостей, як-то: набір тексту (різними шрифтами та мовами), верстка, перевірка орфографії, вставка в текст об'єктів (графіків, діаграм, баз даних і т. ін.), створення таблиць, різноманітні можливості редагування, наявність майстрів тексту й шаблонів, друк, можливості встановлення прав доступу до документу й багато іншого. За допомогою макрокоманд є можливість створювати команди-програми, які виконуються в текстових документах Word.

Цей процесор дозволяє відкривати багато вікон для сумісної роботи з декількома текстами. Існують можливості налаштування інтерфейсу й режиму роботи програми з урахуванням індивідуальних потреб користувача.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Відкрийте програму Microsoft Word і на основі готового шаблону створіть новий документ; збережіть його під своїм ім'ям.

2. Робота с текстом.

Введіть текст:

«Інформатика – отрасль науки, которая изучает свойства и структуру информации, а также способы поиска, обработки, сохранения и распространения информации в различных сферах деятельности.

Информационные технологии – совокупность систематических и массовых способов переработки

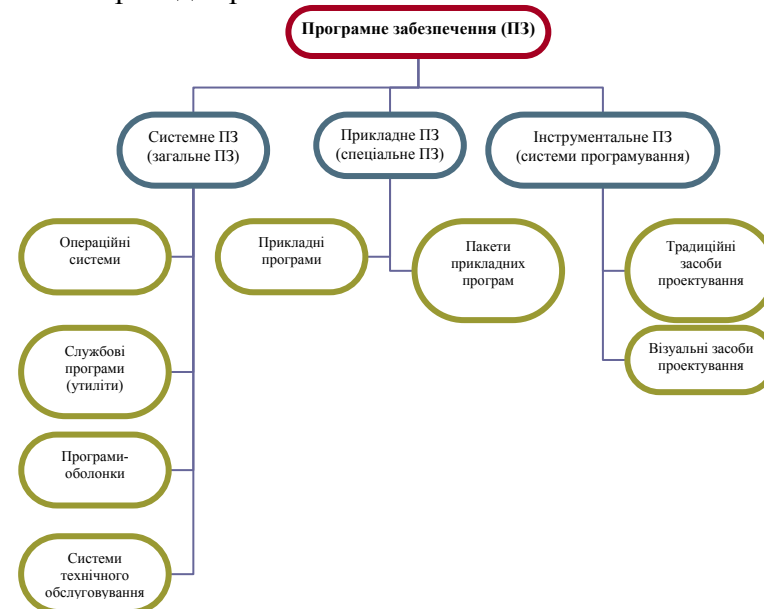
информации для получения информации нового качества на основе компьютерных вычислительных систем.

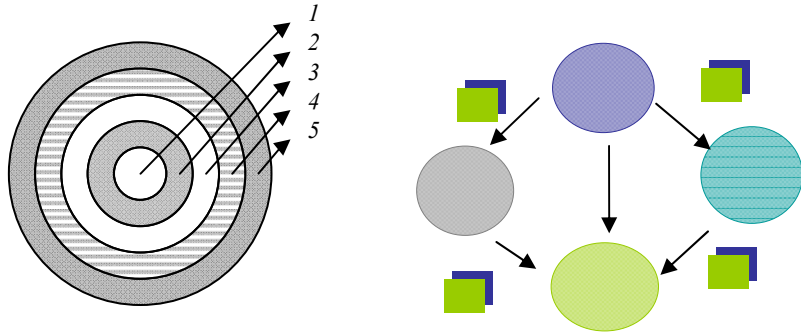
Химическая информатика изучает информационные процессы и системы в химических средах, проблемы управления в химических информационных структурах.»

3. Для введенного тексту замініть стиль шрифту (Bookman Old Style, Courier, Impact, Verdana або інше) й розмір, встановіть відступ абзацу на 0.5 пт, міжрядковий інтервал – подвійний. Наведіть текст у вигляді маркірованого списку. Встановіть параметри сторінки (всі поля 2 см), орієнтація – книжкова, масштаб відтворення сторінки – за шириною вікна. Розмістіть текст зліва, справа, за шириною сторінки.

Додайте другу сторінку та скопіюйте туди набраний текст; наведіть його в вигляді колонок.

4. Створіть діаграми:





5. Створіть таблиці:

6. Введіть формули й вирази, використовуючи редактор формул:

Гетерогенна рівновага: $K_n A_m \rightleftharpoons nK^{m+} + mA^{n-}$

Добуток розчинності: $k_s = [K^{m+}]^n \cdot [A^{n-}]^m$

Зміна ентропії реакції: $\Delta S^0 = \sum S_{\text{прод}}^0 - \sum S_{\text{реар}}^0$

Рівняння Ареніуса: $k = k_0 e^{-E/RT}$

Рівняння Нернста: $E = E^0 + \frac{RT}{nF} \ln a_{M^{n+}}$

Хімічний потенціал для i -го компоненту в газовій суміші:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln \tilde{P}_i$$

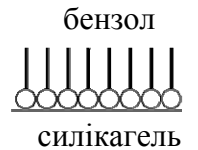
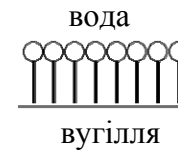
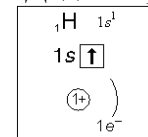
Функція щільності розподілу Гауса: $P = \frac{e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}}{\sigma\sqrt{2\pi}}$

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \Psi^2(x) dx = 1$$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & x > a. \end{cases}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 6 \\ -3 & 2 \end{pmatrix}$$

7. Додайте рисунки й схеми:



8. Додайте до набраного тексту список Вашої групи в довільному порядку. Перетворіть текст у таблицю. Відсортуйте список у алфавітному порядку.

9. Збережіть зміни в документі та скопіюйте його на зовнішній носій інформації.

10. Підготуйте документ до друку, задайте параметри друку.

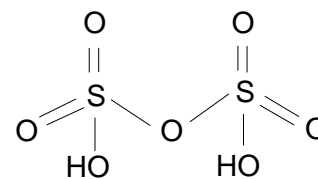
II. Робота у редакторі ISIS DRAW

(або xDrawChem).

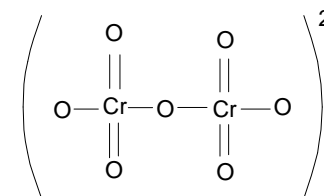
Знайомство з MICROSOFT POWERPOINT

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

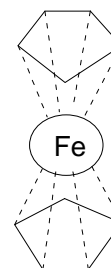
1. Введіть запропоновані структури за допомогою редактору ISIS DRAW 2.1.4.



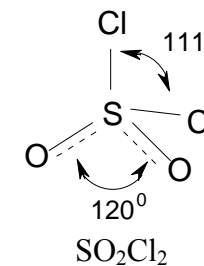
Піросірчана кислота

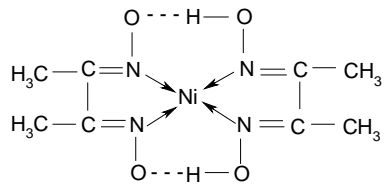


Дихромат-іон

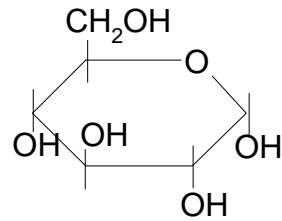


Фероцен ($\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$)

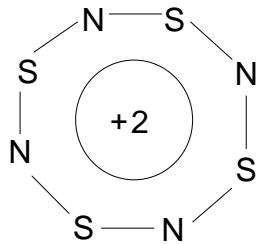




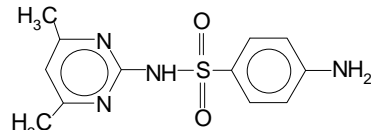
Диметилгліоксимат нікелю



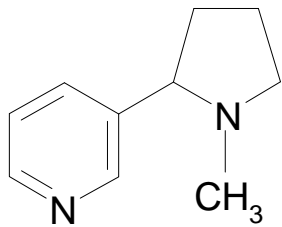
Глюкоза



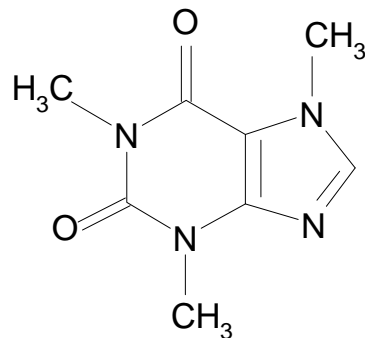
Структура іона $N_4S_4^{2+}$



Сульфадимідин
(антибіотик і стимулятор
росту)

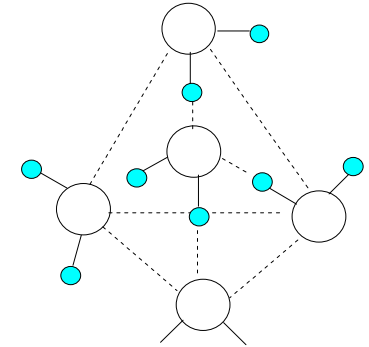


Нікотин

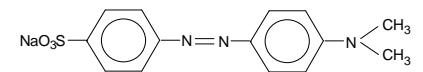
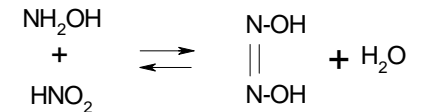


Кофеїн

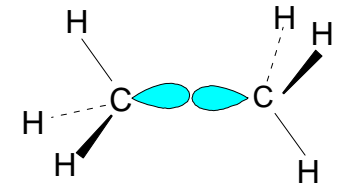
Схема водневих зв'язків для молекул води (структура льоду)



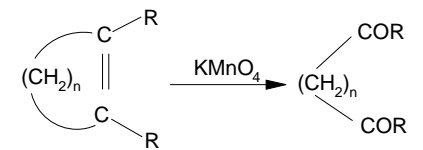
Азотноватиста кислота може бути отримана в незначних кількостях при взаємодії гідроксиламіну й азотистої кислоти:
4-диметиламіноазобензол-4-сульфо кислота (метилевий оранжевий)



Утворення простого σ -зв'язку C-C в молекулі етану



Реакція окислювального розщеплення ненасиченої аліциклічної сполуки призводить до утворення дикарбонової сполуки



2. Створіть короткий тезовий документ або слайд-шоу з презентацією для вищенаведеного матеріалу, використовуючи шаблони оформлення, вставку рисунків або діаграм; переключення між вбудованими макетами, додавання нового слайду з обраним макетом; додавання

ефектів анімації й зміни слайдів; вставка (видалення) слайду; збереження документу; показ презентації.

III. Знайомство з програмним пакетом MICROSOFT EXCEL (LibreOffice Calc)

Вказівки до розв'язку задач.

Всі розрахунки в програмі MICROSOFT EXCEL починаються з введення символу «=».

При виконанні операцій з матрицями слід виділити пусті клітинки під результуючу матрицю, записати необхідний вираз, та натиснути комбінацію клавіш [Ctrl] + [Shift] + [Enter].

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Представте дані про середньодобову температуру (табл. III.1) у вигляді графіків (точковий, лінійний, гістограма).

2. Побудуйте діаграму (у вигляді гістограми) відвідування студентами занять (табл. III.2). На одній діаграмі покажіть відвідування всіх груп.

Табл. III.1.

Дата	Середня температура, °C
24.09.22	13.5
25.09.22	11.3
26.09.22	10.4
27.09.22	10.1
28.09.22	9.5
29.09.22	9.6
30.09.22	12.5
1.10.22	10.0
2.10.22	11.5
3.10.22	11.2

Табл. III.2.

Дата	Кількість студентів		
	група X-1	група X-2	група X-3
27 бер.	12	13	9
28 бер.	11	11	9
31 бер.	12	10	10
1 квіт.	11	10	9
2 квіт.	9	12	8
3 квіт.	10	12	8
4 квіт.	8	11	9
7 квіт.	11	11	10
8 квіт.	10	11	9
9 квіт.	9	10	8
10 квіт.	8	12	9
11 квіт.	10	12	9
14 квіт.	12	13	9
15 квіт.	10	13	10

3. Знайдіть значення виразу $\sum_{n=1}^{10} \frac{n+1}{\sqrt{n^3}}$.

4. Обчисліть $\frac{9! - 7!}{8!}$.

5. Розрахуйте значення функції $f(x) = \frac{e^x}{\sum_i x_i}$ для $x = [0.6; 0.62; \dots; 0.98]$.

6. Для x , що змінюється від 3 до 10 з кроком 0.5

побудуйте графік функції $f(x) = \begin{cases} x^2, & x \geq 3 \\ x^4 + 5, & x > 4 \\ x^3 + 4, & x > 6 \\ x^2 + 5, & x > 8 \end{cases}$.

7. Знайдіть графічно розв'язок системи рівнянь $\begin{cases} y = \frac{\sqrt{x}}{\cos(x/\pi)} \\ y = \frac{\sin(\pi/x)}{x} \end{cases}$ в діапазоні $x = [0.2; 0.23; \dots; 0.77]$.

8. Побудуйте на одній діаграмі графіки функцій $y_1 = \frac{\sqrt{x}}{\ln x}$ та $y_2 = \frac{x}{3x^2 - 0.3x}$ для $x = [0.4; 0.75; \dots; 4.25]$.

9. Для $x = [1; 1.75; \dots; 11.5]$ розрахуйте значення функцій $Y_1 = 3.5 \cdot x^2 - 25$ і $Y_2 = 0.3 \cdot x^3 - 1.67 \cdot x^2 + 3 \cdot x + 5$ та представте їх у графічному вигляді як згладжені лінії.

10. Розв'яжіть рівняння $x^3 - 3x^2 + x = -1$ за допомогою підгонки параметрів та графічно (в інтервалі $x = [-3; -2.8; \dots; 3]$).

11. Для масивів

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 7 \\ 0 & 3 & -1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 7 \\ 8 & 1 & 6 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 7 & 9 & 0 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 11 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

а) знайдіть детермінанти, обернені та транспоновані матриці. Переконайтеся, що добуток прямої й оберненої матриці (для квадратних не вироджених матриць B та C) є одиничною матрицею;

б) обчисліть добутки матриць $A \cdot B$, $A \cdot D$, $D \cdot A$, $B \cdot C$ та $C \cdot B$. Переконайтеся у відсутності комутативності добутку матриць;

в) знайдіть $B + C$;

г) розрахуйте $0.5 \times B$ та $-2 \times A$.

12. Розв'яжіть системи лінійних рівнянь

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 7 \\ x_1 + 5x_2 - 2x_3 = 6 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 9 \end{cases} \text{ та } \begin{cases} 11x_1 + 9x_2 + x_3 = 17 \\ 7x_1 + 5x_2 + 2x_3 + 10x_4 = 10 \\ 12x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 19 \\ 8x_1 + 3x_2 + 10x_3 + 4x_4 = 27 \end{cases}$$

13. Побудуйте гіперболічний параболоїд $\frac{x^2}{9} - \frac{y^2}{4} = 2z$ для $x = [-3; -1.5; \dots; 3]$ і $y = [-2; -1.5; \dots; 2]$.

14. Побудуйте графіки поверхонь $z = \frac{1+x-y}{\sqrt{1+x^2+y^2}}$ та $x^2 + y^2 + z^2 = 25$ при x та y , які приймають значення від $-5 \div 5$ з кроком 0.5 .

15. При $x = [1; 1.5; \dots; 20]$ обчисліть функції x^2 , \sqrt{x} , $\log(x)$, та розрахуйте коефіцієнти кореляції обраних пар функцій:

$$r_{ab} = \frac{\sum_i (a_i - \bar{a})(b_i - \bar{b})}{\sqrt{\sum_i (a_i - \bar{a})^2} \sqrt{\sum_i (b_i - \bar{b})^2}}$$

Отримані результати перевірте за допомогою вбудованої функції CORREL (КОРРЕЛ).

Самостійна робота

- Знайдіть значення виразу $\prod_{n=3}^{20} \frac{\log_2(n)}{\sqrt{n}}$
- Знайдіть розв'язок рівнянь (Тільки дійсні корені. Скільки їх ?)
 $z^4 - 5 \cdot z^3 + z = 1$;
 $0.1 \cdot x^3 + 2.4 \cdot x^2 + x - 2.6 = 0$;
 $y^3 - y^2 - 5 \cdot y = 3$.
- Побудуйте графіки параметрично заданих функцій:
а) $t \in [0; 2\pi]$, крок 0.05π

$$x(t) = 15 \cdot \left(\cos(t) + \frac{\cos(5 \cdot t)}{5} \right),$$

$$y(t) = 30 \cdot \left(\sin(t) - \frac{\sin(5 \cdot t)}{5} \right)$$

б) $t \in [0; 2\pi]$, крок 0.15

$$x(t) = 10 \cdot \sin^3(t),$$

$$y(t) = 15 \cdot \cos(t) - 5 \cdot \cos(2 \cdot t) - 2 \cdot \cos(3 \cdot t) - \cos(4 \cdot t)$$

в) $t \in [0; 15\pi]$, крок $0.1 \cdot \pi$

$$x(t) = \sin(t) \cdot \left(e^{\cos(t)} - 2 \cdot \cos(4 \cdot t) + \sin^5\left(\frac{t}{12}\right) \right),$$

$$y(t) = \cos(t) \cdot \left(e^{\cos(t)} - 2 \cdot \cos(4 \cdot t) + \sin^5\left(\frac{t}{15}\right) \right)$$

- Побудуйте графік поверхні

$$x = 1, 1.5 \dots 10, \quad y = -1, -1.5 \dots -10$$

$$f(x, y) = (x \cdot y)^2 \cdot \exp\left(-\frac{x^3 + y^2}{100}\right).$$

5. Знайдіть графічні розв'язки рівняння $\sin(\exp(x)) = x^2/3 - x/2 - 0.4$, в інтервалі $[-2;3]$. Скільки таких розв'язків?

6. В інтервалі $x = 2, 2.3 \dots 8$ побудуйте на одній діаграмі графіки функції

$$f(x) = e^{\sqrt{x}} - 3 \cdot \sqrt{x^3}$$

і її першої похідної. У вказаних точках x порівняйте чисельні значення похідних з аналітичними. Порівняйте точність двох численних способів обчислення похідної:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta} \quad \text{и} \quad f'(x) \approx \frac{f(x+\delta) - f(x-\delta)}{2\delta}$$

Який спосіб розрахунку точніший? Чому?

Контрольна робота № 1

Тема «Microsoft Excel».

1. В таблиці наведено дані (сумарний бал) результатів контрольної роботи студентів в чотирьох групах. Розрахуйте середній бал в кожній групі й впишіть його в нижню строку.

1	2	3	4
25	20	19	18
20	18	22	20
14	19	20	21
22	21	16	19
19	17	19	25
21	25	21	24
17		25	13
22		23	
Середній бал			

2. Система рівнянь

$$\begin{cases} 2y^2 + x^2 = 1 \\ y = 5x^2 \end{cases}$$

в діапазоні x від -0.5 до 0.5 з кроком 0.05 має ___ розв'язків, а саме:

3. Знайдіть розв'язок системи лінійних рівнянь.

$$\begin{cases} 5x_1 + 3x_2 - x_3 - 2x_4 = 15 \\ x_1 - 6x_3 + x_4 = 10 \\ 10x_1 - x_2 + x_3 + x_4 = 19 \\ x_1 + 2x_2 - 7x_3 = 9 \end{cases} \quad \begin{matrix} x_1 = \\ x_2 = \\ x_3 = \\ x_4 = \end{matrix}$$

4. Для матриць $A = \begin{pmatrix} 3 & 10 & 1 \\ 5 & 1 & 7 \\ 0 & 13 & 5 \end{pmatrix}$ й $B = \begin{pmatrix} 1 & 9 & 5 \\ 8 & 1 & 3 \\ 11 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

Знайдіть детермінанти ($|A| = \underline{\hspace{2cm}}$, $|B| = \underline{\hspace{2cm}}$).

Обчисліть добутки:

$$AB =$$

$$BA =$$

5. Знайдіть корені рівняння $x^3 - 5x^2 + 2x = -2$ й запишіть їх нижче

(вказівка – корені слід шукати в діапазоні x від -2 до 6):

IV. Знайомство з програмним пакетом SciLab

1. Алгебра

1. Знайдіть значення виразів:

$$a + b; a - b; \frac{a}{b}; a \cdot b; \sqrt{a}; \sqrt{b}; a^3; b^{0.4}; b^a; a!,$$

$$\text{якщо } a = 2, b = 1.8$$

2. Знайдіть значення виразу:

$$\frac{123 + \sqrt{7.5}}{(23 - 54)^3} - \sqrt[3]{\frac{3}{16} - \frac{9}{41}} + 0.86^2$$

3. Знайдіть значення виразу

$$\cos^3\left(\frac{\pi}{3}\right) - \sin(3\pi) - \lg(e)$$

4. Знайдіть значення виразів при різних численних значеннях змінних:

а) $x = 0.1$ и $y = 1.7$; б) $x = 0.07$ и $y = 3.8$

$$z = \frac{\sqrt{x} - \lg(y)}{\sqrt{y^3 - x^3}}, s = \frac{\sqrt[3]{\cos^2\left(\frac{\pi}{3}\right) - x}}{(x + y)^3 - \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)},$$

$$d = \sqrt{2 \cos\left(\frac{\pi}{18.6}\right)^3} \cdot \frac{\ln(\sin(\pi/3))}{2} + \sqrt[3]{x + y}$$

5. Визначте функцію:

$$f(x, y, z) = \frac{\sqrt{\cos(x) \cdot \sin(x)}}{(x^2 + y^2)} + \ln(z).$$

При значеннях змінних $t=19.9$, $u=13.2$ розрахуйте

$$f(\sin(t), \ln(u), u^2); f(t, \sqrt{t}, u^2); f(f(1,2,3), 4, 5).$$

6. Знайдіть похідні функцій:

$$f(x) = x^2 + \frac{e^x}{(x-0.5)^3}, \text{ при } x = 5;$$

$$f(x) = (a - b \cdot x^3)^2, \text{ при } x = -0.4;$$

$$f(x) = \ln(\ln(x^2)), \text{ при } x = 12.7$$

7. Знайдіть інтеграл функції:

$$\int_2^5 y(x) dx, \text{ якщо } y(x) = (5 \cdot x)^2 + \frac{1}{(1-x)^3}$$

8. Знайдіть корені квадратного рівняння:

$$3x^2 + 5x + 1 = 0.$$

Введіть вираз у вигляді полінома, вказав коефіцієнти при змінній: **p = poly([1,5,3], 'x', 'c')**. Для знаходження корнів, використовуйте функцію **roots(p)**.

Знайдіть корені наступних рівнянь:

$$4x^2 + 2x - 5 = 0; \quad 0.1x^3 + 2.4x^2 + x - 2.6 = 0; \quad 6x^5 + 5x^4 + 4x^3 + 3x^2 + 2x + 1 = 0$$

$$x^2 - 12x - 347 = 0; \quad x^2 - 57x + 350 = 0; \quad y^3 - 0.5y^2 - 3y = 0$$

9. Використання циклів. Шляхом прямого розрахунку перевірте справедливість таких тверджень:

$$\sum_{n=0}^{\infty} 1/2^n = 2; \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} = \frac{\pi}{4}; \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} = \frac{1}{e}.$$

2. Графіки функцій

10. Побудуйте графік функції (функція **plot**)

$$y = \cos(2x)$$

для x в інтервалу від $-\pi$ до π з кроком 0.1.

11. Побудуйте в одній області наступні графіки

$$y1 = \sqrt{|1-x^2|}, \quad y2 = x^2, \quad y3 = \sin\left(\frac{x}{\pi}\right) \text{ для } x \text{ в}$$

інтервалі від -6 до 6

12. Фігура Ліссажу

$$N = 100, \quad N1 = 4, \quad N2 = 5$$

$$j = 1 \dots N$$

$$x = \sin(N1 \cdot 2\pi \cdot j / N), \quad y = \cos(N2 \cdot 2\pi \cdot j / N).$$

Співвідношення частот задається відношенням величин $N1$ та $N2$. Змінюючи це співвідношення можна отримати різні фігури. У випадку $N1 = N2$ отримуємо коло.

13. Побудуйте графік x від y :

$$N=10 \cdot \pi, \quad s = 0 \dots N, \quad \text{крок } 0.1$$

$$x = s \cdot \cos(s)$$

$$y = s \cdot \sin(s)$$

14. Побудуйте полярні графіки (функція **polarplot(r,t)**)

A	B
$r = 0 \dots 2\pi.$	$r = 0 \dots 2\pi$
$t = \cos(r)$	$t = 5\cos(3r+4)$

15. Побудуйте графік поверхні (**plot3d**)

$$t = 0 \dots 2\pi \text{ з кроком } 0.3,$$

$$z = \sin(t) \cdot \cos(t)$$

```
--> t=[0:0.3:2*%pi]';
--> z=sin(t)*cos(t);
--> plot3d(t,t,z);
```

16. Побудуйте графік поверхні

$$z = 5y^2 - x^2,$$

якщо $x = -2 \dots 2$ (крок 0.1) та $y = -3 \dots 3$ (крок 0.1)

```
--> x=[-2:0.1:2];
--> y=[-3:0.1:3];
--> for j=1:length(y)
--> for i=1:length(x)
--> z(i,j)=5*y(j)^2-x(i)^2;
--> end
--> end
--> plot3d(x',y',z)
```

17. Побудуйте графік поверхні

$$u = -\pi/2 \dots \pi/2 \quad v = 0 \dots 2\pi$$

$$x(u,v) = \cos(u) \cdot \cos(v)$$

$$y(u,v) = \cos(u) \cdot \sin(v)$$

$$z(u,v) = \sin(u)$$

```
--> u=linspace(-%pi/2,%pi/2,150);
--> v=linspace(0,2*%pi,140);
--> x=cos(u)*cos(v);
--> y=cos(u)*sin(v);
--> z=sin(u)*ones(v);
--> plot3d3(x,y,z);
```

3. Матриці і маніпуляції із ними

18. Введіть матрицю, знайдіть її визначник, ранг, обернену (якщо це можливо). Знайдіть добуток прямої та оберненої матриць. Чи отримали Ви одиничну матрицю? Знайдіть транспоновану матрицю.

(операція транспонування матриці A позначається як A^+).

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 7 & 2 & 5 \\ 8 & 4 & 8 \end{pmatrix} \quad N = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1.5 & 4 \\ 4 & 3 & 1 & 0 \\ 0.5 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 7 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

19. Введіть наступні матриці:

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{pmatrix} \quad R = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 7 \\ 1 & 2 & 4 \\ 9 & 3 & 1 \end{pmatrix} \quad T = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 2 & 7 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} \quad \alpha = 12.5$$

Обчисліть: $\alpha \cdot V$, $V \cdot U$, $U \cdot V$, $V^+ \cdot U$, $S \cdot U$, $U \cdot S$, S/α , S^{-1} , R^2 , $\alpha \cdot T^+$, $S+R$, $R \cdot R^+$, $(S+R) \cdot (T \cdot S)^{-1}$.

Переконайтесь, що

1) $(S \cdot R) \cdot T = S \cdot (R \cdot T)$

2) $(S+R) \cdot T = S \cdot T + R \cdot T$

3) $S \cdot R \neq R \cdot S$ (в окремому випадку, якщо $S \cdot R = R \cdot S$ – матриці S и R зуться комутативними)

4) $(S+R)^+ = S^+ + R^+$

5) $(S \cdot R)^+ = R^+ \cdot S^+$

- 6) $(S^{-1})^{-1} = S$
 7) $(\alpha \cdot S)^{-1} = \alpha^{-1} \cdot S^{-1}$, где $\alpha = 0.5$
 8) $(S \cdot R)^{-1} = R^{-1} \cdot S^{-1}$
 9) $(S^{-1})^+ = (S^+)^{-1}$

20. Розв'язання неоднорідної системи лінійних рівнянь

Знайдіть рішення для наступних систем лінійних рівнянь:

$$\begin{cases} 3x_1 - x_2 = 5 \\ -2x_1 + x_2 + x_3 = 0 \\ 2x_1 - x_2 + 4x_3 = 15 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 4 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 10 \\ 2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 5x_4 = 14 \\ x_2 + 2x_3 + 3x_4 = 7 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 0.6x_1 + 0.6x_2 + 0.3x_3 + x_4 + 0.05x_5 = 3 \\ 0.4x_1 + 1.2x_2 + 2.4x_3 + 3.6x_4 + 4x_5 = 4 \\ 5x_1 + 0.3x_2 + 0.4x_3 + 0.5x_4 + 0.1x_5 = 5 \\ 3.2x_1 + 1.2x_2 + x_3 + 0.5x_4 + x_5 = 6 \\ 2.1x_1 + 1.1x_2 + 1.2x_3 + 4.1x_4 + 3x_5 = 9 \end{cases}$$

**Розв'язок систем лінійних рівнянь
(загальний випадок)**

Нагадаємо, що система рівнянь називається **однорідною** якщо права частина (вільні члени) нульові, інакше – система є **неоднорідною**.

$$Ax = b.$$

В цій задачі, з квадратною матрицею A , може реалізуватися три випадки:

- 1) Детермінант (визначник) матриці не нульовий, вільні члени також ненульові
 $\det(A) \neq 0, \quad b \neq 0.$

В цьому випадку система рівнянь має **одне-єдине рішення (сумісна система)**: $x = A^{-1}b$

- 2) Детермінант матриці дорівнює нулю, вільні члени ненульові

$$\det(A) = 0, \quad b \neq 0$$

Тут система має **нескінчену кількість** розв'язків якщо ранг матриці A і розширеної матриці $[A, -b]$ рівні ($\text{rank}(A) = \text{rank}([A, -b])$). Рішення рівнянь можна знайти, за допомогою методу Гауса,

$$\text{rref}([A, -b])$$

Інакше, якщо $\text{rank}(A) \neq \text{rank}([A, -b])$, система **не має рішень**. В цьому випадку, при використанні функції $\text{rref}([A, -b])$ виникає некоректний вираз типу $0 = \text{не нуль}$.

- 3) Детермінант матриці дорівнює нулю, вільні члени дорівнюють нулю:

$$\det(A) = 0, \quad b = 0.$$

В цьому випадку система має **нескінчену кількість розв'язків, які** можна знайти за допомогою функції `rref([A])`

Зауваження: Якщо матриця A прямокутна, то може реалізуватися два варіанти:

- a) $b \neq 0$ див. 2)
- b) $b = 0$ див. 3)

21. В якості прикладу розглянемо три задачі з прямокутною матрицею (стехіометричні матриці однакові, результуючий вектор різний):

$\begin{cases} x_1 + 1.5x_2 + 3x_3 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 + 6x_3 = 1 \end{cases}$	$\begin{cases} x_1 + 1.5x_2 + 3x_3 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 + 6x_3 = 2 \end{cases}$	$\begin{cases} x_1 + 1.5x_2 + 3x_3 = 0 \\ 2x_1 + 3x_2 + 6x_3 = 0 \end{cases}$
розв'язків немає	нескінченна кількість розв'язків: $x_1 = 1 - 1.5x_2 - 3x_3$	нескінченна кількість розв'язків: $x_1 = -1.5x_2 - 3x_3$

При розрахунках в програмі **SciLab** використовуйте функції: `det(A)`, `rank(A)`, `rank([A,-b])`, `rref(A)`, `rref([A,-b])`

Самостійна робота (Scilab)

1. Знайдіть значення виразу

$$y = \frac{1}{z^2 + x^2} + \frac{\sqrt[3]{z}}{\pi \cdot \ln(x)}$$

при $x = 100$, $z = 16$; $x = 3$ і $z = 30$.

2. У графіка функції $b(a) = 0.2 \cdot a^3 + 7 \cdot a - 10$ і графіка її другої похідної, що побудовані в інтервалі $a = -5 \div 5$ (крок 0.75), спостерігається ____ точок перетину.

Скільки коренів має рівняння $0.2a^3 + 7a = 10$ у дійсній області ?

3. Знайдіть значення інтегралу функції

$$y = \frac{x^2 - 1}{\ln(x^2 - 1)} + \sin\left(\frac{x}{\pi}\right)$$

в інтервалі $[2-7]$. Визначте значення похідної в точці $x=5$.

4. Для матриць

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 7 \\ 5 & 9 & 2 \\ 6 & 1 & 4 \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} -9 & 3 & 1 \\ 2 & 0 & 7 \\ -4 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

знайдіть $M^2 \cdot N^{-1} - 3(M + N)^+$ та докажіть, що $(M^1 \square N)^+ = N^+ \square (M^+)^{-1}$

5. Графічно розв'яжіть системи рівнянь:

$$\begin{cases} 5x - 8y = 0 \\ x - \frac{y^2}{5} = 1 \end{cases} \quad \text{в інтервалі від } 1.05 \text{ до } 5.05 \text{ (крок } 0.2)$$

$$\begin{cases} \sin x + 2y = 2 \\ \cos y + x = 0.7 \end{cases} \text{ в інтервалі від } -0.2 \text{ до } 1.5 \text{ (крок } 0.1)$$

6. Знайдіть корені поліномів

$$0.9x^4 + 4.2x^3 - 8.5x^2 - 13 = 0, \quad 5x^3 - 13x = 11$$

7. Вкажіть 3 можливих рішення системи лінійних рівнянь

$$\begin{cases} 1x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 0 \\ 5x_1 + 6x_2 + 7x_3 + 8x_4 = 0 \\ 1x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 0 \\ 9x_1 + 10x_2 + 11x_3 + 12x_4 = 0 \end{cases}$$

Перевірте коректність знайдених рішень.

8. Графічним методом розв'яжіть рівняння

$$e^x - x^3 + 1 = 0$$

ДОВІДНИК (Функції SciLab)

Вбудовані величини

Число e	%e
Число π	%pi
Уявна одиниця	%i

Операції

Очистка (знищення) змінної. Наприклад a і x	clear ('a', 'x')
\sqrt{a}	sqrt(a)
Корінь довільного ступеня $\sqrt[k]{a}$	nthroot(a,k)
Ступінь ($c=a^b$)	c = a^b
Натуральний логарифм числа x	log(x)
Десятинний логарифм x	log10(x)
Логарифм числа x за основою 2	log2(x)
змінна x «пробігає» усі значення в інтервалі від 0 до 2π , з кроком 0.1	x = 0:0.1:2*%pi
Модуль числа	abs(a)
Факторіал ($4! = 24$)	A = factorial(4)
Знаходження кореню поліному ($x^2+x-1=0$)	p=poly([-1,1,1], 'x', 'c') roots(p)
Оператор циклу. Змінна i «пробігає» значення від 1 до 10	for i=1:10 end
Екстрений вихід із циклу (наприклад за умовою)	break
Умовний оператор. Приклад: якщо $d \leq 10^{-5}$ то t=0 інакше t = 1	if d<= 1e-5 then t=0 else t=1 end

Матричні операції (приклад)

Вектор-стрічка $V = (1 \ 2)$	$V=[1,2]$
Вектор-стовпчик $V = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ (транспонування вектору-строки)	$V=[1;2]$ $V=[1,2]'$
Матриця $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$	$A=[1,2;2,3]$
Діагональ матриці	$\text{diag}(A)$
Встановити матричний елемент (наприклад викласти в елемент $A(2,3)=10.5$)	$A(2,3)=10.5$
Матричний добуток (наприклад, $C = A \cdot B$)	$C=A*B$
Транспонування матриці $C = A^+$	$C = A'$
Детермінант (визначник)	$\text{det}(A)$
Ранг матриці	$\text{rank}(A)$
Сума елементів масиву	$\text{sum}(A)$
Добуток елементів масиву	$\text{prod}(A)$
Обернення матриці	$A^{(-1)}$ або $\text{inv}(A)$
Одинична матриця (наприклад, 5-того порядку)	$I=\text{eye}(5,5)$
Сингулярний розклад матриці	$T=\text{svd}(B)$
Конкатенація двох масивів A, B $A = \begin{pmatrix} 1 & 7 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} -3 & 4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	cat $\text{cat}(1,A,B) \begin{pmatrix} 1 & 7 \\ 2 & 3 \\ -3 & 4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\text{cat}(2,A,B) \begin{pmatrix} 1 & 7 & -3 & 4 \\ 2 & 3 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

Власні значення матриці	$\text{spec}(A)$
Власні вектори матриці	$[\text{V}, \text{diagevals}]=\text{spec}(A)$
Виділити з масиву менший масив $G = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 8 & 5 & 0 \\ 3 & 1 & 7 \end{pmatrix}$	$G([1:2],[2:3])$ або $G(1:2,2:3)$ $\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 5 & 0 \end{pmatrix}$
Якщо ви хочете з'ясувати розмір масиву (або вектору) x	$\text{length}(x)$

Розв'язок системи лінійних рівнянь $Ax=b$

Метод оберненої матриці	$x=A^{-1}b$
Команда linsolve дає розв'язок рівняння $Ax-b=0$.	linsolve(A,-b)
Метод Гауса (розв'язок рівняння $Ax-b=0$)	rref([A,-b])

Графіка

Плaskий графік	$\text{plot}(x,\sin(x))$ $\text{plot}(x,\sin(x),x,\cos(x))$
Розмітка графіку	xgrid
Відкрити графічне вікно 2	$\text{scf}(2)$
Надписи: назва графіку, по вісі x, по вісі y	$\text{xtitle}('my graph', 'x-axis', 'y-axis')$
Позначення кривих на графіку	$\text{legend}('sin(x)', 'cos(x)')$
Полярний графік ($\rho=4\cos(4r)$)	$\text{polarplot}(r, \rho)$
Поверхня	$\text{plot3d}(x,y,z)$

Робота з функціями

Визначити функцію $f(x,y) = \sqrt{x^2 + y^2}$, Обчислити значення	Варіант №1 $\text{deff}('z=f(x,y)', 'z=\text{sqrt}(x*x+y*y)');$ $f(2,3)$
--	---

цієї функції при $x=2$, $y=3$.	Варіант №2 (функція повертає багато величин) deff('z1,z2]=f(x,y)', 'z1=sqrt(x*x+y*y), z2=x*y'); [z1,z2]=f(2,3);
	Варіант №3 function [z] =f(x,y) z=sqrt(x^2+y*2); endfunction
Диференціювати функцію однієї змінної (чисельно!) $f(x) = \sqrt{x^2 + \pi x}$ в точці $x=1.2$	Варіант №1 (без параметрів) function [z] =fu(x), z=sqrt(x^2+%pi*x), endfunction x=1.2; numdiff(fu,x) // в SciLab 6.0 і вище: numderivative(fu,x)
Диференціювати функцію багатьох змінних (наприклад двох) $f(x, y) = x^3 + 2y^2$	function [z] =fu(x,p), z=x^3+2*p^2 endfunction x=0.3; p=3 ; numderivative(list(fu,p),x) простий спосіб: function [z] =fu(x,p), z=x(1)^3+2*x(2)^2 endfunction x(1)=0.3; x(2)=3 ; numderivative(fu,x)
Інтегрування функції (чисельно !)	intg(a,b,fu); тут a і b – нижня і верхня межі інтегрування (відповідно), fu – функція що інтегрується.

Контрольна робота № 2

Тема «SciLab».

1. Значення виразу $y = \frac{1}{z^2 + x^2} + \frac{\sqrt[3]{z}}{\pi \cdot \ln(x)}$ при $x = 100$ і $z = 16$ складає _____, а при $x = 3$ і $z = 30$ складає _____.

2. Запишіть аналітичні вирази для всіх можливих перших часткових похідних функції $f(\alpha, \beta) = \frac{\alpha^2}{(\pi - \beta)^3} + \sqrt{0.5 \cdot \beta}$

3. В графіка функції $b(a) = 0.2 \cdot a^3 + 7 \cdot a - 10$ і графіка її другої похідної, побудованих в інтервалі $a = -5 \div 5$ (крок 0.75), спостерігається _____ точок перетину. Рівняння $0.2 \cdot a^3 + 7 \cdot a = 10$ має _____ коренів в дійсній області, а саме _____.

4. Запишіть аналітичний вираз інтегралу функції $f(t) = \sin(3t)^3$ _____. Значення цього інтегралу в межах $[\pi; 2\pi/3]$ складає _____.

5. Для матриць $M = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 7 \\ 5 & 9 & 2 \\ 6 & 1 & 4 \end{pmatrix}$, $N = \begin{pmatrix} n/3 & n & 1 \\ 0 & -n & 0 \\ 2n & 1 & 1 \end{pmatrix}$,

знайдіть:

M^{-1} , M^+ , N^{-1} , N^+ , MN (Добуток)

6. Вкажіть 3 можливих розв'язки системи лінійних рівнянь

$$\begin{cases} 1x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 0 \\ 5x_1 + 6x_2 + 7x_3 + 8x_4 = 0 \\ 1x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 0 \\ 9x_1 + 10x_2 + 11x_3 + 12x_4 = 0 \end{cases}$$

V. Матриці в описі хімічних рівнянь

Вказівки до розв'язку задач.

Методи лінійної алгебри активно використовуються для прогнозування всіх можливих реакцій, які можуть протікати між заданими речовинами. Але зацікавленість викликають лінійно-незалежні реакції (такі, в яких з головних (базисних) компонентів можуть бути отримані всі сполуки в реакційній суміші). Існує декілька алгоритмів складання припустимих рівнянь реакцій, 2 з них наведені нижче.

Алгоритм 1.	Алгоритм 2.
1. Сформувати атомну матрицю β , стовпці якої відповідають атомам (всього M атомів), рядки – існуючим сполукам (всього N сполук).	
2. Обчислити число лінійно-незалежних рівнянь системи як різницю між кількістю існуючих сполук і рангом атомної матриці.	2. Розкласти матрицю β на матриці b_1 та b_2 , причому $ b_1 \neq 0$, розмірність $b_1 = [r \times r]$, де $r = \text{rank}(\beta)$, b_2 – залишок матриці β .
3. Записати рівняння між всіма сполуками системи в канонічному вигляді, тобто $\sum_{i=1}^N a_i X_i = 0$, де a – стехіометричні коефіцієнти, X – сполуки.	3. Обчислити матриці $a_1 = -b_2 \cdot b_1^{-1}$ та a_2 , причому a_2 – одинична квадратна матриця розмірності $[N - r]$.
4. Розв'язати систему лінійних рівнянь $a \cdot \beta = 0$ за допомогою функцій <code>rref</code> , <code>solve</code> , або блоку <code>given – find</code> .	4. Розмістити масив a_2 справа від a_1 .
5. Отримана матриця $i \in$ матрицею стехіометричних	

коефіцієнтів хімічних рівнянь між сполуками в системі. Їх можна записати у звичному вигляді, тобто «реагенти = продукти» (стехіометричні коефіцієнти продуктів реакції негативні).

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Проаналізуйте реакцію синтезу метанолу з CO і H₂ в присутності CO₂ і H₂O. Складіть припустимі рівняння реакцій.

2. Побудуйте систему лінійно незалежних реакцій між сполуками: CH₄, CH₂O, O₂, H₂O.

3. При взаємодії водяної пари з вугіллям в реакційній суміші з'являються такі речовини: H₂O, C, CO, H₂, CO₂. Скількима рівняннями реакцій може бути описана ця система? Знайдіть ці реакції та їх стехіометричні коефіцієнти.

4. Реакція $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$ відбувається за участю проміжних сполук H, HO та атомарного кисню O. Складіть рівняння незалежних реакцій і знайдіть стехіометричні коефіцієнти.

5. Встановіть можливі стехіометрично незалежні реакції, що описують систему, яка містить C₂H₄, Cl₂, C₂H₃Cl, C₂H₄Cl₂, HCl. Який ще (крім знайденого) можливий вибір незалежних реакцій?

6. При УФ-опроміненні газової суміші Cl₂ і O₂ протікає ряд процесів. Спектральними методами було встановлено, що в суміші, крім Cl₂ і O₂ міститься, також, вільний радикал ClO і атомарний хлор. Побудуйте можливу систему хімічних реакцій.

7. Встановіть стехіометричні коефіцієнти можливих реакцій за участю набору речовин: H_2 , O_2 , CO , CO_2 , H_2CO , H_2O , CH_3OH , C_2H_5OH , $(CH_3)_2CO$, CH_3CHO , CH_4 .

8. Запишіть хімічні реакції для набору речовин: H_2 , O_2 , HCl , H , H^+ , Cl_2 , Cl , Cl^- , H_2O , O .

9. Запишіть рівняння реакції гідролізу Na_2CO_3 (у складі розчину є компоненти: Na_2CO_3 , Na^+ , CO_3^{2-} , HCO_3^- , H_2O , H_3O^+ , H^+ , OH^- , H_2CO_3 , CO_2), перевірте придатність в якості базисних функцій H , O , C , Na , $+1$. Оберіть в якості базисного набору наступні компоненти: CO_2 , H^+ , OH^- , Na^+ .

10. Складіть рівняння, що описують повний гідроліз $FeCl_3$. У розчині містяться такі компоненти: $FeCl_3$, H_2O , Fe^{3+} , H^+ , $Fe(OH)^{2+}$, $Fe(OH)_2^+$, $Fe(OH)_3$ і Cl^- . В якості базисних елементів можна обрати Fe^{3+} , H^+ , Cl^- , OH^- .

11. В реакції парової конверсії беруть участь такі речовини: C_2H_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , H_2 , C_6H_6 , CO , CH_4 , C . Знайдіть можливі рівняння реакцій, що описують парову конверсію.

12. Реакція піролізу етилену проходить по вільно-радикальному механізму за участю п'яти стабільних частинок (C_2H_6 , CH_4 , C_2H_4 , H_2 , C_4H_{10}) і трьох інтермедіатів (активних сполук з неспареним електроном) CH_3 , C_2H_5 , H . Знайдіть можливу систему хімічних рівнянь, які пов'язують ці сполуки.

13. Реакція взаємодії метану з водяною парою проходить за участю каталізатора Z . У реакційної суміші

виявлено речовини: CH_4 , H_2O , H_2 , CO , CO_2 , а також адсорбовані на активних центрах молекули і інтермедіати (ZCH_2 , ZCO , ZO). Побудуйте можливі рівняння хімічних реакцій, які пов'язують ці речовини.

VI. Рівняння матеріального балансу

Вказівки до розв'язку задач.

В цьому розділі методами лінійної алгебри із всіх існуючих компонентів системи виділяються ключові (такі, з яких можна отримати всі інші компоненти системи) та знаходиться залежність зміни концентрацій неключових компонентів від концентрацій ключових. Алгоритм розрахунків такий.

1. Сформуйте стехіометричну матрицю A розмірністю $[N \times M]$, де N – кількість компонентів системи, M – кількість реакцій.

2. Розкладіть матрицю A на матриці A_1 та A_2 , причому $|A_1| \neq 0$, розмірність $A_1 = [r \times r]$, де $r = \text{rank}(A)$, A_2 – залишок матриці A . Рядки матриці A_1 – ключові сполуки (N_1), рядки A_2 – неключові сполуки (N_2).

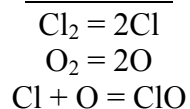
3. Зміна концентрацій неключових сполук ΔN_2 через зміну концентрацій ключових ΔN_1 задається рівнянням $\Delta N_2 = A_2 A_1^{-1} \Delta N_1$.

Комбінуючи методи, що описані у розділі VI з методами розділу VII, маємо можливість, припускаючи лише наявність певних компонентів в реакційній суміші, скласти систему хімічних рівнянь, що їх пов'язують та виділити ключові компоненти.

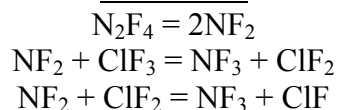
Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Для нижченаведених систем знайдіть ключові речовини та виразіть зміну концентрацій неключових речовин через ключові.

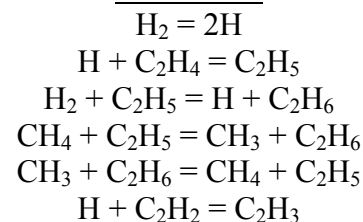
Система 1.



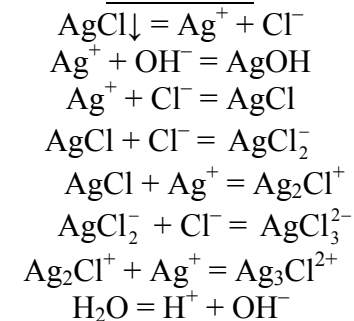
Система 2.



Система 3.



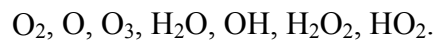
Система 4.



Контрольна робота № 3

Тема «Матриці в описі хімічних реакцій. Рівняння матеріального балансу».

В фотохімічній реакції беруть участь такі молекули і вільні радикали:



1. Атомна матриця для даної системи має вигляд:	2. В цій системі _____ лінійно-незалежних реакцій, тому _____ що _____. 3. Результуюча матриця стехіометричних коефіцієнтів:				
4. Система хімічних рівнянь	5. <table border="1" data-bbox="427 954 969 1406"><tr><td data-bbox="427 954 689 1031">Ключовими сполуками є:</td><td data-bbox="689 954 969 1031">Неключовими сполуками є:</td></tr><tr><td data-bbox="427 1031 689 1406"></td><td data-bbox="689 1031 969 1406"></td></tr></table>	Ключовими сполуками є:	Неключовими сполуками є:		
Ключовими сполуками є:	Неключовими сполуками є:				

6. Зміна концентрації неключових сполук виражається залежністю:	7. Знайдена в п. 4 система хімічних рівнянь є (потрібно підкреслити) єдино можливою / існують альтернативні, а саме:
---	--

VII. Регресійний аналіз

Вказівки до розв'язку задач.

Задачі цього розділу розв'язуються за допомогою вбудованого в програму MICROSOFT EXCEL пакету аналізу. Його необхідно активувати в меню «Сервіс → Надбудови → Пакет аналізу».

В системі OPENOFFICE (LibraOffice) рекомендується використовувати функцію **LINEST** (категорія **ARRAYS**). Ця функція формує шукані параметри регресії

$$y = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_{k-1}x_{k-1} + a_kx_k$$

у наступному вигляді:

$$a_k, a_{k-1}, a_{k-2}, \dots, a_0$$

$$\sigma_{a_k}, \sigma_{a_{k-1}}, \sigma_{a_{k-2}}, \dots, \sigma_{a_0}$$

$$R^2, SD,$$

де R^2 – коефіцієнт детермінації, а SD – стандартне відхилення (*Standard Deviation*)

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Запропонуйте функцію для обчислення теплоти згоряння нормальних алканів, алкенів з кінцевим подвійним зв'язком та первинних спиртів (експериментальні дані наведені в табл. VII.1, VII.2 та VII.3). Оцініть теплоту згоряння сполук з 12 та 14 вуглецевими атомами. Розрахуйте статистичні параметри моделі та оцініть якість апроксимації за допомогою R^2 та SD . Побудуйте графік залежності експериментальних від теоретично розрахованих теплот згоряння.

Табл. VII.1.

№	Сполука	Брутто формула	Теплота згоряння, кДж/моль
1	Метан	CH ₄	890.95
2	Етан	C ₂ H ₆	1560.92
3	Пропан	C ₃ H ₈	2221.52

4	н-бутан	C ₄ H ₁₀	2880.43
5	н-пентан	C ₅ H ₁₂	3539.1
6	н-гексан	C ₆ H ₁₄	4197.7
7	н-гептан	C ₇ H ₁₆	4856.7
8	н-октан	C ₈ H ₁₈	5515.7

Табл. VII.2.

№	Сполука	Формула	Теплота згоряння, кДж/моль
1	Етилен	H ₂ C=CH ₂	1411.91
2	Пропен	H ₂ C=CHCH ₃	2059.86
3	н-бутен-1	H ₂ C=CHC ₂ H ₅	2720.42
4	н-пентен-1	H ₂ C=CHC ₃ H ₇	3377.9
6	н-гексен-1	H ₂ C=CHC ₄ H ₉	4037.3
7	н-гептен-1	H ₂ C=CHC ₅ H ₁₁	4696.3
8	н-октен-1	H ₂ C=CHC ₆ H ₁₃	5355.3
9	н-нонен-1	H ₂ C=CHC ₇ H ₁₅	6014.8
10	н-децен-1	H ₂ C=CHC ₈ H ₁₇	6673.8

Табл. VII.3.

№	Сполука	Формула	Теплота згоряння, кДж/моль
1	метанол	CH ₃ OH	764.43
2	етанол	C ₂ H ₅ OH	1410.03
3	пропанол	C ₃ H ₇ OH	2064.93
4	бутанол	C ₄ H ₉ OH	2721.00
5	пентанол	C ₅ H ₁₁ OH	3377.70
6	гексанол	C ₆ H ₁₃ OH	4034.40
7	гептанол	C ₇ H ₁₅ OH	4691.73
8	октанол	C ₈ H ₁₇ OH	5349.06
9	нонанол	C ₉ H ₁₉ OH	6006.38
10	деканол	C ₁₀ H ₂₁ OH	6663.71

2. Експериментальні дані про залежність мольної теплоємності ацетилену та метану від температури при тиску 1 атм. представлені в табл. VII.4 та VII.5.

Табл. VII.4.

T, °K	C _p ^o , ккал/моль·K
300	9.91
400	11.07
500	12.13
600	13.04
700	13.82
800	14.51
900	15.1
1000	15.63

Табл. VII.5.

T, °K	C _p ^o , Дж/моль·K
298	35.73
400	40.73
500	46.57
600	52.51
700	58.07
800	63.18
900	67.82
1000	72
1100	75.69
1200	78.99

Припускаючи квадратичну $C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2$ та/або кубічну $C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \cdot T^3$ залежності мольної теплоємності сполук від температури, розрахуйте параметри цих моделей та оцініть якість апроксимації кожної з них, порівнюючи **R²** та **SD**. Побудуйте та проаналізуйте графіки залежностей:

1) експериментальних теплоємностей від теоретично розрахованих;

2) експериментальних та теоретично розрахованих теплоємностей від температури.

3. Виходячи з даних таблиці VII.6 (дані з таблиці заносьте в 2 стовпчики – T та C_p, тобто отримаєте 21

рядок) знайдіть коефіцієнти многочлену 3 ступеню для опису залежності теплоємності води від температури.

$$C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \cdot T^3$$

Табл. VII.6.

T, °C	C _p	T, °C	C _p	T, °C	C _p
0	1.00762	35	0.99818	70	1.00091
5	1.00392	40	0.99828	75	1.00167
10	1.00153	45	0.99837	80	1.00253
15	1.00000	50	0.99849	85	1.00351
20	0.99907	55	0.99919	90	1.00461
25	0.99852	60	0.99967	95	1.00586
30	0.99826	65	1.00024	100	1.00721

Дослідіть також якість альтернативних функцій:

$$C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 / (T + 1)$$

$$C_p^o = a_0 + a_1 \cdot T + a_2 \cdot T^2 + a_3 \sqrt{T}$$

Яка з вказаних функцій найкраще описує експериментальні дані? Побудуйте та проаналізуйте графіки залежності:

1) експериментальних теплоємностей від теоретично розрахованих;

2) експериментальних та теоретично розрахованих теплоємностей від температури.

3) стандартизованих похибок $(y_i - \hat{y}_i) / SD$ від y_i .

VIII. Теорія графів і топологічні індекси

Вказівки до розв'язку задач.

Топологічні індекси відіграють важливу роль у розрахунку кількісних співвідношень «структура-властивість» та «структура-активність» (QSPR- і QSAR-аналіз).

Для розрахунку індексів необхідно побудувати молекулярний граф сполуки, матрицю суміжності A і матрицю відстаней D . Обидві матриці мають розмірність $N \times N$, де N – кількість атомів вуглецю у молекулі. Матриця суміжності складається з 0 і 1, причому $A_{ij} = 1$ якщо атом i напряму пов'язаний хімічним зв'язком з атомом j . Елементи D_{ij} – цілі числа, які можуть приймати значення від 0 до $N-1$ (в разі лінійної молекули, при наявності ізомерів максимальне значення D_{ij} менше $N-1$). Вони показують кількість хімічних зв'язків, розташованих між атомами i та j .

Далі необхідно обчислити ступені вершин $v_i = \sum_j A_{ij}$

відповідного графа.

Набір індексів обчислюється за формулами:

- індекс Рандіча $\chi^{(1)} = \sum_{(i,j)} (v_i v_j)^{-1/2}$;

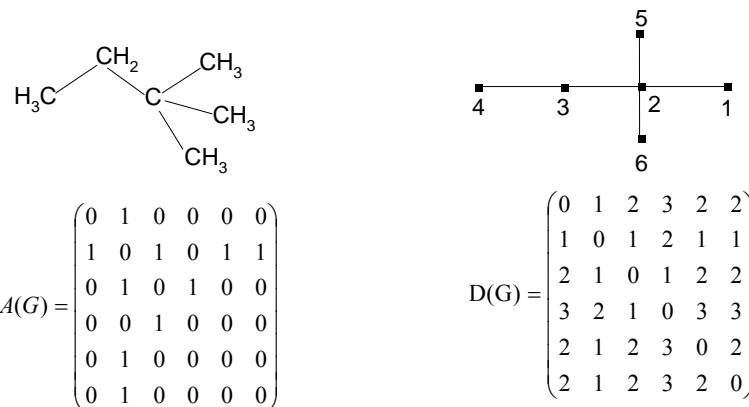
- індекс $M_1(G) = \sum_i v_i^2$;

- індекс $M_2(G) = \sum_{(i,j)} (v_i v_j)$;

- індекс $IC_1 = -\sum_{k=1}^K \frac{m}{N} \log\left(\frac{m}{N}\right)$, де K – кількість сортів атомів, m – кількість атомів даного сорту;

- індекс Вінера $W = \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij}$.

Приклад: Розрахунки індексів для 2,2-диметилбутан



Атом	1	2	3	4	5	6
Ступінь вершини	1	4	2	1	1	1

Індекс Рандіча: $\chi^{(1)} = \sum_{(i,j)} (v_i v_j)^{-1/2}$ - характеристика

молекулярної зв'язності

$$\chi^{(1)} = \sum_{(i,j)} (v_i v_j)^{-1/2} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 \cdot 4}}}_{\text{зв'язок 1-2}} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 \cdot 4}}}_{\text{зв'язок 5-2}} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 \cdot 4}}}_{\text{зв'язок 2-6}} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2 \cdot 4}}}_{\text{зв'язок 2-3}} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 \cdot 2}}}_{\text{зв'язок 3-4}} = 2.561$$

Індекс $M_1(G)$ - сума по всім вершинам

$$M_1(G) = \sum_i v_i^2 = 1^2 + 4^2 + 2^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 = 24$$

Індекс $M_2(G)$ - сума по всім парам зв'язаних атомів

$$M_2(G) = \sum_{(i,j)} (v_i v_j) = \underbrace{1 \cdot 4}_{\text{зв'язок 1-2}} + \underbrace{1 \cdot 4}_{\text{зв'язок 5-2}} + \underbrace{1 \cdot 4}_{\text{зв'язок 2-6}} + \underbrace{2 \cdot 4}_{\text{зв'язок 2-3}} + \underbrace{1 \cdot 2}_{\text{зв'язок 3-4}} = 22$$

Індекс IC_1 – розраховується з урахуванням найближчих сусідів

Група	Атоми груп	Кількість атомів у групі
1	1, 4, 5, 6	4
2	2	1
3	3	1

Загальна кількість атомів: $6 = 4 + 1 + 1$.

$$IC_1 = -\left(\frac{4}{6} \log_2 \frac{4}{6} + \frac{1}{6} \log_2 \frac{1}{6} + \frac{1}{6} \log_2 \frac{1}{6}\right) = 1,252 \text{ (біт)}$$

При розрахунках можна використовувати логарифм з іншою підставою (натуральний або десятковий).

Індекс Вінера $W = \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij}$

$$W = 10 + 5 + 5 + 6 + 2 = 28$$

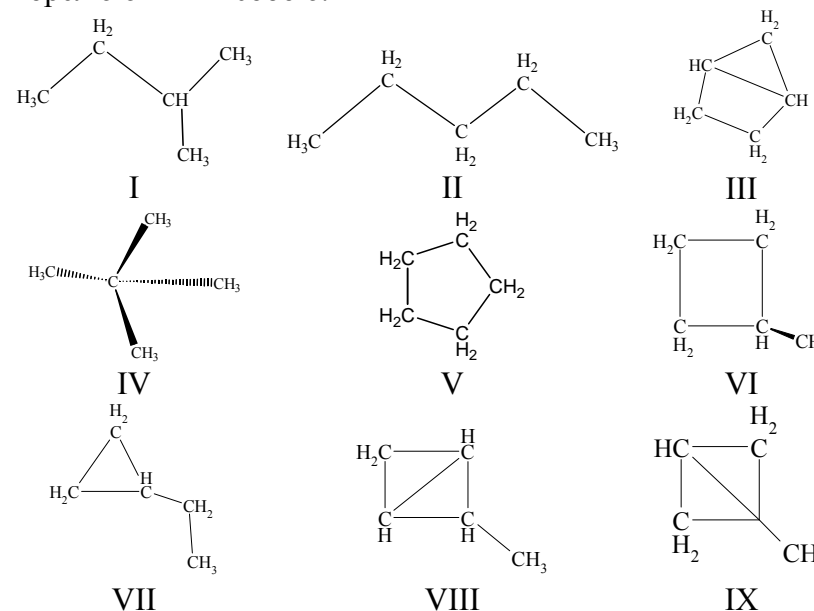
Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Для дев'яти вуглеводнів, наведених нижче, побудуйте таблицю індексів

Вуглеводень	$\chi^{(1)}$	$M_1(G)$	$M_2(G)$	W	IC_1
I					
II					

...					
IX					

Розрахуйте коефіцієнти кореляції між індексами. З'ясуйте, які з наведених індексів з високою ступінню корелюють між собою.



ІХ. Знаходження залежності «структура – властивість»

Вказівки до розв'язку задач.

Задачі цього розділу розв'язуються з використанням алгоритму розрахунку топологічних індексів молекул та вбудованого в програму MICROSOFT EXCEL пакету аналізу.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. Обчисліть функцію, яка описує залежність швидкості бромовання метилбензолів ($\lg v$) в залежності від кількості (n) та положення метильних груп (наприклад, $\log v = a_0 + a_1n + a_2IC_1$, $\log v = a_0 + a_1n + a_2\chi_1 + a_3IC_1$, $\log v = a_0 + a_1n + a_2M_2 + a_3IC_1$). На підставі знайдених статистичних параметрів побудованих регресійних моделей зробіть висновок, яка з функцій найкраще описує експериментальні дані. Експериментальні дані наведені в табл. ІХ.1.

Табл. ІХ.1.

Похідні бензолу	$\lg v$
бензол	0
толуол	2.78
1,4-діметилбензол	3.39
1,2-діметилбензол	3.72
1,3-діметилбензол	5.71
1,2,4-триметилбензол	6.18
1,2,3-триметилбензол	6.22
1,2,3,4-тетраметилбензол	7.04
1,3,5-триметилбензол	8.28
1,2,3,5-тетраметилбензол	8.62
пентаметилбензол	8.91

Табл. ІХ.2.

Алкільна група	Відносна швидкість реакції
метил	30
етил	1
н-пропіл	0.4
н-бутил	0.4
ізопропіл	0.025
ізобутил	0.03
трет-бутил	0.005
неопентил	0.00001

Табл. ІХ.3.

№	Сполука	Розчинність у мольних долях, $-\lg X$
1	бутанол-1	1.750
2	2-метилпропанол	1.743
3	бутанол-2	1.724
4	3-метилбутанол	2.254
5	2-метилбутанол	2.207
6	пентанол-2	2.025
7	пентанол-3	1.961
8	гексанол-1	2.957
9	гексанол-2	2.961
10	гексанол-3	2.542

2. Запропонуйте функцію для апроксимації відносної швидкості нуклеофільного заміщення хлорпохідних насичених вуглеводнів від структури молекули. Експериментальні дані наведені в табл. ІХ.2.

3. Для ряду насичених спиртів з табл. IX.3 побудуйте функцію залежності розчинності $-\lg X$ від структурних параметрів. Оцініть якість апроксимації. Розрахуйте розчинність 3-метилбутанола-2 та пентанола і порівняйте її з експериментальними значеннями ($-\lg X$ дорівнює 1.926 та 2.332 відповідно).

4. Енергія дисоціації хімічного зв'язку R-X залежить від структури вуглеводневого радикалу й замісника. Побудуйте емпіричну функцію для опису залежності енергії дисоціації від параметрів X і R, виходячи з даних табл. IX.4.

Табл. IX.4.

R	H	I
CH ₃ -	427	226
CH ₃ CH ₂ -	410	218
CH ₃ CH ₂ CH ₂ -	398	209
(CH ₃) ₂ CH-	373	197
(CH ₃) ₃ C-	230	188
(CH ₃) ₃ CCH ₂ -	210	151
CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃ CH ₂)-	197	163
CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)-	150	230
CH ₃ (CH ₂) ₅ -	161	239

5. Похідні барбітурової кислоти володіють снодійним ефектом різної тривалості (табл. IX.5). Обчисліть функцію, яка описує тривалість дії барбітуратів в залежності від параметрів замісника (наприклад, $t = a_0 + a_1N + a_2\chi^{(1)}$, $t = a_0 + a_1N + a_2IC_1$, $t = a_0 + a_1N + a_2M_1$).

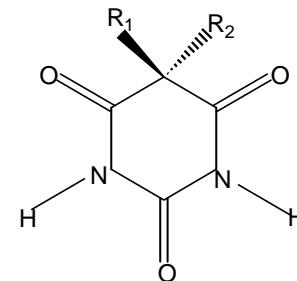


Табл. IX.5.

R ₁ = CH ₃ CH ₂ -			
№	R ₂	Структура R ₂	Тривалість дії (хв.)
1	C ₂ H ₅ -	CH ₃ CH ₂ -	1400
2	C ₃ H ₇ -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ -	1140
3	C ₃ H ₇ -	CH ₃ CH(CH ₃)-	1520
4	C ₄ H ₉ -	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ -	450
5	C ₆ H ₁₃ -	CH ₃ (CH ₂) ₅ -	45
6	C ₆ H ₁₃ -	CH ₃ CH ₂ C(CH ₃) ₂ CH ₂ -	60
7	C ₆ H ₁₃ -	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH(CH ₃)-	90
8	C ₆ H ₁₃ -	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃ CH ₂)CH ₂ -	300
9	C ₇ H ₁₅ -	CH ₃ (CH ₂) ₆ -	120
10	C ₇ H ₁₅ -	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ -	54
11	C ₇ H ₁₅ -	(CH ₃) ₂ CH(CH ₂) ₂ CH(CH ₃)-	50
12	C ₇ H ₁₅ -	CH ₃ CH ₂ CH(CH ₃)CH ₂ CH(CH ₃)-	74

6. Логарифм константи розподілу речовини між двома фазами, що не змішуються (октанол – вода), $\lg P, P = \frac{C_{ocnanol}}{C_{water}}$ є важливою фармакологічної характеристикою. Побудуйте регресійну модель виду $\lg P = a_0 + a_1N + a_2IC_1$ (експериментальні дані наведені в табл. IX.6) для опису цих величин в спиртах.

Табл. IX.6.

№	Структура	$\lg P$
1	метанол	-0.77
2	етанол	-0.31
3	2-пропанол	0.05
4	1-пропанол	0.25
5	2-метил-2-пропанол	0.35
6	2-бутанол	0.61
7	2-метил-1-пропанол	0.76
8	1-бутанол	0.88
9	1-пентанол	1.56
10	1-гексанол	2.03
11	1-гептанол	2.72
12	1-октанол	2.97

7. Побудуйте функцію, яка описує температуру кипіння алканів (табл. IX.7). В якості незалежних змінних можна вибрати число атомів вуглецю (N), IC_1 , $\chi^{(1)}$, M_1 , M_2 .

Табл. IX.7.

№	Вуглеводень	T, C°
1	етан	-88.63
2	пропан	-42.07
3	н-бутан	-0.5
4	2-метилпропан	-11.73
5	н-пентан	36.074
6	2-метилбутан	27.852
7	2,2-диметилпропан	9.503
8	н-гексан	68.74
9	2-метилпентан	60.271
10	3-метилпентан	63.282
11	2,2-диметилбутан	49.741

12	2,3-диметилбутан	57.988
13	н-гептан	98.427
14	2-метилгексан	90.052
15	3-метилгексан	91.85
16	3-етилпентан	93.475
17	2,2-диметилпентан	79.197
18	2,3-диметилпентан	89.784
19	2,4-диметилпентан	80.5
20	3,3-диметилпентан	86.064
21	2,2,3-триметилбутан	80.882
22	н-октан	125.665
23	2-метилгептан	117.647
24	3-метилгептан	118.925
25	4-метилгексан	117.709
26	3-етилгексан	118.534
27	2,2-диметилгексан	106.84
28	2,3-диметилгексан	115.607
29	2,4-диметилгексан	109.429
30	2,5-диметилгексан	109.103
31	3,3-диметилгексан	111.969
32	3,4-диметилгексан	117.725
33	2-метил-3-етилпентан	115.65
34	3-метил-3-етилпентан	118.259
35	2,2,3-триметилпентан	109.841
36	2,2,4-триметилпентан	99.238
37	2,3,3-триметилпентан	114.76
38	2,3,4-триметилпентан	113.467
39	2,2,3,3-тетраметилбутан	106.47

Х. Адитивні схеми

Вказівки до розв'язку задач.

У побудуванні адитивної схеми для розрахунку властивостей сполук використовується представлення

властивості у вигляді $Y = \sum_{i=1}^N n_i \chi_i$, де n_i – кількість атомів

або молекулярних фрагментів даного сорту, χ_i – парціальна величина, що визначає внесок атомів або молекулярних фрагментів даного сорту у властивість Y .

Для знаходження парціальних величин необхідно сформулювати матрицю A розмірністю $[N \times M]$, де N – кількість молекул у вибірці, M – кількість сортів атомів (для насичених вуглеводнів можна обрати 4 сорти атомів – первинний, вторинний, третинний та четвертинний вуглець) та вектор-стовпчик Y , який містить властивості молекул.

Вектор парціальних величин знаходиться як $\chi = (A^T A)^{-1} A^T Y$.

Завдання для аудиторного та самостійного розв'язання.

1. В табл. X.1 наведені експериментальні дані про ліпофільність насичених вуглеводнів.

Табл. X.1.

	Сполука	Формула	log P
1	етан	CH ₃ -CH ₃	1.81
2	пропан	CH ₃ -CH ₂ -CH ₃	2.36
3	бутан	CH ₃ -CH ₂ -CH ₂ -CH ₃	2.89
4	2-метилпропан	CH ₃ -CH(CH ₃)-CH ₃	2.76
5	Пентан	C ₅ H ₁₂	3.39
6	2-метилбутан	(CH ₃) ₂ CH-CH ₂ -CH ₃	3.77

7	2,2-диметилпропан	C(CH ₃) ₄	3.11
8	гексан	C ₆ H ₁₄	3.90
9	2,2-диметилбутан	(CH ₃) ₃ C-CH ₂ -CH ₃	3.82
10	2,3-диметилбутан	(CH ₃) ₂ CH-CH(CH ₃) ₂	3.42
11	гептан	C ₇ H ₁₆	4.66
12	октан	C ₈ H ₁₈	5.18
13	декан	C ₁₀ H ₂₂	5.01
14	н-додекан	C ₁₂ H ₂₆	6.10
15	тетрадекан	C ₁₄ H ₃₀	7.20

Розробіть адитивну схему для передбачення ліпофільності насичених вуглеводнів. Розрахуйте парціальні ліпофільності обраних фрагментів. Який вклад вносять обрані фрагменти у загальну ліпофільність? Оцініть якість апроксимації за величинами дисперсій і кореляцій між експериментальними і теоретичними значеннями ліпофільності. З 9 можливих ізомерів гептану оберіть сполуки з максимальним та мінімальним значеннями ліпофільності.

2. В табл. X.2 наведені експериментальні теплоти утворення алканів. Для 80 відсотків сполук з таблиці (вибірка має містити сполуки з малими, середніми та великими значеннями теплот утворення) побудуйте адитивну схему, оцініть її якість. Для сполук, що не увійшли у вибірку, розрахуйте теоретичні значення теплот утворення та співставте їх з експериментальними.

Контрольна робота № 4

Тема «Регресійний аналіз. Теорія графів».

Табл. X.2.

№	Вуглеводень	$\Delta H_{298,16}^{\circ}$ (ккал/моль)	№	Вуглеводень	$\Delta H_{298,16}^{\circ}$ (ккал/моль)
1	метан	-352.61	23	н-октан	-1998.32
2	етан	-585.49	24	2-метилгептан	-2000.00
3	пропан	-820.62	25	3-метилгептан	-1999.34
4	н-бутан	-1056.15	26	4-метилгексан	-1999.20
5	2-метилпропан	-1057.79	27	3-етилгексан	-1998.90
6	н-пентан	-1291.88	28	2,2-диметилгексан	-2002.21
7	2-метилбутан	-1293.80	29	2,3-диметилгексан	-1999.63
8	2,2-диметилпропан	-1296.55	30	2,4-диметилгексан	-2000.94
9	н-гексан	-1527.38	31	2,5-диметилгексан	-2001.71
10	2-метилпентан	-1529.08	32	3,3-диметилгексан	-2001.11
11	3-метилпентан	-1528.44	33	3,4-диметилгексан	-1999.41
12	2,2-диметилбутан	-1531.77	34	2-метил-3-етилпентан	-1998.98
13	2,3-диметилбутан	-1529.91	35	3-метил-3-етилпентан	-1999.88
14	н-гептан	-1762.85	36	2,2,3-триметилпентан	-2001.11
15	2-метилгексан	-1764.56	37	2,2,4-триметилпентан	-2002.07
16	3-метилгексан	-1763.92	38	2,3,3-триметилпентан	-2000.23
17	3-етилпентан	-1763.30	39	2,3,4-триметилпентан	-2000.47
18	2,2-диметилпентан	-1767.25	40	2,2,3,3-тетраметилбутан	-2002.49
19	2,3-диметилпентан	-1765.58	41	н-нонан	-2233.78
20	2,4-диметилпентан	-1766.26	42	н-декан	-2469.25
21	3,3-диметилпентан	-1766.13	43	н-додекан	-2940.18
22	2,2,3-триметилбутан	-1766.92	44	н-гексадекан	-3882.05

В таблиці наведені дані, що описують теплоту утворення алканів.

№	Алкан	$\Delta H_{298,16}^{\circ}$ (ккал/моль)
1	метан	-352.61
2	пропан	-820.62
3	н-бутан	-1056.15
4	н-пентан	-1291.88
5	2-метилбутан	-1293.80
6	н-гексан	-1527.38
7	3-метилпентан	-1528.44
8	2,2-диметилбутан	-1531.77
9	2-метилгексан	-1764.56
10	3-етилпентан	-1763.30
11	2,3-диметилпентан	-1765.58
12	н-октан	-1998.32
13	2-метилгептан	-2000.00
14	4-метилгексан	-1999.20
15	3-етилгексан	-1998.90
16	2,3-диметилгексан	-1999.63
17	3,3-диметилгексан	-2001.11
18	3-метил-3-етилпентан	-1999.88
19	2,2,4-триметилпентан	-2002.07
20	н-декан	-2469.25

1. Знайдіть коефіцієнти в рівняннях регресій та запишіть самі рівняння (в учбову вибірку відберіть 50% молекул, які позначте в таблиці):

а) $\Delta H = a_0 + a_1 N_C + a_2 \chi^{(1)}$

_____, $r =$ _____, $s =$ _____.

б) $\Delta H = a_0 + a_1 N_C + a_2 M_1$

_____, $r =$ _____, $s =$ _____.

2. Запишіть рівняння залежності $\Delta H_{\text{теор}}$ від $\Delta H_{\text{експ}}$:

а) _____, $r =$ _____, $s =$ _____.

б) _____, $r =$ _____, $s =$ _____.

3. Для опису цього набору даних слід використовувати рівняння а / б (необхідне підкресліть), тому що

4. Для трьох молекул, що не увійшли в учбову вибірку, обчисліть ΔH

Додатки

Нижче наведені основні функції, вбудовані в розглянуті розрахункові пакети, які використовуються для розв'язку задач посібнику.

Опис функції	Запис функції	
	Matcad	Excel
Потенціювання (обчислення e^x)	exp(x) e^x	exp(x)
Знаходження логарифму		
- десятинного	log(x)	log10(x)
- натурального	ln(x)	ln(x)
Обчислення x^y	x^y	x^y
Обчислення модулю $ a $	abs(a) $ a $	abs(a)
Добуток матриць $A \cdot B$	$A \cdot B$	мумнож(A;B) mmult(A;B)
Знаходження матриці, оберненої до A	A^{-1}	мобр(A) minverse(A)
Знаходження матриці, транспонованої до A	A^T	трансп(A) transpose(A)
Знаходження детермінанту матриці A	$ A $	мопред(A) mdeterm(A)

Рекомендована література

Базова

1. Вступ до інформаційних технологій. Методичний посібник для викладачів і студентів. Під ред. Зарецької І. Т., Владимирової М. В. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2006. – 364 с.
2. Інформатика. Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології : підручник / В.А. Баженов, П.С. Венгерський, В.М. Горлач та ін. – К.: Каравела, 2003. – 462 с.
3. Structured computer organization / Andrew S. Tanenbaum, Todd Austin. -- 6th ed., 2013. – 770 p.
4. Computer Networks /Andrew S. Tanenbaum, David J. Wetherall. – 6th ed., Prentice Hall, 2011. - 960 p.
5. Злобін Г.Г. Основи інформатики, комп'ютерної техніки і комп'ютерних технологій – К.: Каравела, 2007. – 239 с.
6. Інформатика. Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології : підручник / В.А. Баженов, П.П. Лізунов, А.С. Резников та ін. –К.: Каравела, 2007. – 639 с.
7. Косинський В.І., Швець О.Ф. Сучасні інформаційні технології – К. : Знання, 2011. – 318 с.
8. Пушкарь О.І. Інформатика: Комп'ютерна техніка. Комп'ютерні технології / О.І. Пушкарь – К.: Академія, 2003. – 704 с.
9. Broido V.L. Computing systems, networks and telecommunications. – Publishing house Peter, 2006. – 703 p.
10. Stallings W. Data and computer communications (8th ed.). - Pearson Education, Inc, 2007. - 901 p.
11. King R. V. Chemical Applications of Topology and Graph Theory. – Elsevier, 1983. – 512 p.
12. Неділько С. А. Математичні методи в хімії. – Київ: Либідь, 2005.- 256 с.

13. Kelley C. Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations. – Philadelphia: SIAM Publications, 1995. – 166 p.
14. Quarteroni A., Sacco R., Saleri F. Numerical Mathematics. – New York Berlin Heidelberg: Springer, 2000. – 655 p.
15. Johnson Kennet Jeffrey Numerical Methods in Chemistry. – New York, N.Y.: Dekker, 1980. – 503 p.
16. Руданський Ю. К., Мокрий Є. М., Піх З. Г., Чип М. М., Куриляк І. Й. Математичні методи в хімії та хімічній технології. – Львів: Світ, 1993.– 203 с.
17. Sharaf Dli, M.A., Deborag L. Illman, Kowalski, B.R. Chemometrics. – John Wiley & Sons, New York, 1986. – 352 p.
18. Пантелеймонов А. В., Христенко І. В., Іванов В. В., Холін Ю. В. Інформатика та інформаційні технології для хіміків : Навчальний посібник. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2011. – 60 с.

Допоміжна

1. Lawson C., Hanson, R. Solving Least Squares Problems. – Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1974. – 327 p.
2. Meintjes K., Morgan A., A methodology for solving Chemical Equilibrium Systems, Applied Mathematics and Computation, 1987, 22, p.333-361
3. Peter J. Hansen, Peter C. Jurs Chemical applications of graph theory. Part I. Fundamentals and topological indices *J. Chem. Educ*, 1988, 65, 7, p.574
4. Balaban A. Applications of Graph Theory in Chemistry. *J. Chem. InJ Compur. Sci.*, 25, 1985, p.334
5. Balaban A., Bonchev D., Scitz W. Topological/chemical distances and graph centers in molecular graphs with multiple bonds . *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 1993, 280, 2–3, 6, p. 253
6. Yirik, M.A.; Colpan, K.E.; Schmidt, S.; Sorokina, M.; Steinbeck, C. Review on Chemical Graph Theory and Its

Application in Computer-Assisted Structure Elucidation.
Preprints 2021, 2021110546 (doi:
10.20944/preprints202111.0546.v1).

Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна

Інформатика та інформаційні технології для хіміків

Навчальний посібник
для студентів 2 курсу хімічного факультету

Комп'ютерна верстка А. В. Пантелеймонов

Відомості про авторів

Пантелеймонов Антон Віталійович – кандидат хімічних наук, старший викладач кафедри хімічного матеріалознавства. Наукові інтереси – хемометричні методи аналізу даних, кількісний фізико-хімічний аналіз, метрологія якісного аналізу.

Христенко Інна Василівна – кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімічного матеріалознавства. Наукові інтереси – кількісний фізико-хімічний аналіз, золь-гель синтез ксерогелей.

Іванов Володимир Венедиктович – доктор хімічних наук, старший науковий співробітник, професор кафедри хімічного матеріалознавства. Спеціаліст в галузі хемометрії та квантової хімії.

Холін Юрій Валентинович – доктор хімічних наук, професор, проректор Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства. Лауреат Державної премії України, Заслужений діяч науки і техніки України. Всесвітньо відомий спеціаліст з хемометрії та кількісного фізико-хімічного аналізу.